

Житомирський державний університет імені Івана Франка

(повне найменування вищого навчального закладу)

фізико-математичний факультет (денне відділення)

(повне найменування інституту, назва факультету (відділення))

кафедра фізики

(повна назва кафедри (предметної, циклової комісії))

Дипломна робота

магістр

(освітньо-кваліфікаційний рівень)

на тему Властивості квазістаціонарних станів електрона у відкритій
сферичній квантовій точці

Виконав: студент 6 курсу, групи 62
напряму підготовки (спеціальності)

8.01020301 Фізика*

(шифр і назва напряму підготовки, спеціальності)

Заглада О.М.

(прізвище та ініціали)

Керівник Грищук А.М.

(прізвище та ініціали)

Рецензент _____

(прізвище та ініціали)

Житомир – 2014 року

Анотація

Магістерська робота складається зі вступу, трьох розділів, висновків, списку літератури та додатку і розміщена на 42 сторінках.

У вступу обговорюється актуальність, мета та завдання роботи, також там йдеться про методи розрахунку та наближення які виконувались в роботі.

У першому розділі розглядається задача про рух заряду у полі центральної сили. В ньому проводиться розв'язок рівняння Шредінгера в центрально-симетричному полі.

У другому дається теорія спектра електрона та дірки для системи що складається з відкритої квантової точки.

У третьому розділі проводиться аналіз спектрів випромінювання квазічастинок для відкритої квантової точки.

В додатку поданий лістинг програми розрахунку спектра випромінювання електрона, який знаходиться в квантовій ямі, з використанням програми символьного числення Mathematica 8.0.

Зміст

Вступ.....	4
1. Розв’язок рівняння Шредінгера у випадку сферичної симетрії	7
1.1. Рух у полі центральної сили. Радіальне рівняння Шредінгера.....	8
1.2. Радіальне рівняння Шредінгера для сферичних квантових точок	13
2. Енергетичний спектр електрона у відкритих сферичних квантових точках ..	15
2.1. Розв’язок рівняння Шредінгера для відкритої сферичної квантової точки.....	15
2.2. S-матриця розсіювання	18
3. Закон дисперсії електрона у сферичній квантовій точці HgS/CdS/HgS.....	20
3.1. Властивості квазістаціонарних станів електрона при $l = 0$ у відкритій сферичній квантовій точці (HgS/CdS/HgS).....	20
3.2. Резонансні стани електронів та дірок при $L \neq 0$	27
Висновки	35
Список використаної літератури	36
Додатки.....	39

Вступ

Перші дослідження напівпровідникових квантових точок відбулися на початку 80-х років, коли при вивченні спектрів поглинання скляних фільтрів, легованих напівпровідниками CdSe та CdS, було помічено чіткий пік поглинання[1]. У наступних своїх роботах Екімов А.І., Онущенко А.А. [2,3,4] вже стверджували, що цей пік поглинання пояснюється квантово-розмірним ефектом, який пізніше теоретично був пояснений Ефросом Ал.Л. та Ефросом А.Л. [5] тим, що після процесу термічної обробки скла напівпровідник CdS чи CdSe кристалізувався у вигляді великої кількості крапель сферичної форми. Розміри цих крапель були менші за величину радіуса Бора екситона в масивному напівпровіднику. Таким чином, квазічастинки в напівпровідниках такого малого розміру знаходились у прямокутній потенціальній ямі, стінками якої був бар'єр на межі поділу середовищ напівпровідник – скло. Квантування енергії квазічастинок у такій потенціальній ямі приводить до зростання величини енергії забороненої зони, а, відповідно, і до збільшення енергії міжзонного поглинання світла, яке спостерігалось експериментально.

Інтенсивне вивчення таких квантових ефектів почалося уже після виявлення подібних квантово-розмірних ефектів у спектрах мікрокристалів CuCl у склі [6, 7], CuCl у лужно-хлоридних матрицях [8], CdS у воді [9, 10], нанокристалів Si [11] та інших.

Щоб оцінити енергію забороненої зони у сферичних напівпровідникових нанокристалах, для дірок і електронів використовували модель безмежно глибокої потенціальної ями в рамках наближення ефективної маси. При цьому, модель безмежно глибокої потенціальної ями задовільна лише у випадку, коли величина енергії основного стану електрона набагато менша за висоту бар'єру. Така умова накладає обмеження на мінімальні розміри квантових точок, для яких ця модель справедлива. Оцінки, виконані у роботі [12] для сферичних наносистем

$\text{GaAs-Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$, дають величину 40\AA . При зменшенні розмірів кристалу збільшуються значення енергій електрона і дірки в основному стані, і в результаті зростає величина забороненої зони, перенормованої розмірним квантуванням, а отже, зростає енергія міжзонних переходів, які спостерігались експериментально [1].

У багатьох теоретичних моделях використовується наближення ефективної маси, тієї ж, що вводилась для масивних напівпровідників. При цьому виникає запитання, до яких мінімальних розмірів квантових точок можна застосовувати таке наближення? Відповідь можна знайти в роботі [13], в якій наведено порівняння результатів розрахунків ширини забороненої зони нанокристалів Si у вакуумі, виконаних як методом ефективних мас, так і іншими методами, які не використовують характеристик масивних кристалів [14,15]. Виявляється, що при розмірі квантових точок від 60\AA і більше всі теоретичні методи дають майже однакові результати. При менших розмірах нанокристалів метод ефективних мас дає більші значення ширини забороненої зони. Таким чином, квантові точки, що містять у своєму об'ємі порядку 1000 елементарних комірок напівпровідникового матеріалу з задовільною точністю описуються макроскопічними параметрами, які характеризують відповідні їм об'ємні кристали. При дещо менших розмірах квантових точок метод ефективних мас можна було б застосовувати, увівши деякі поправки до величин ефективних мас квазічастинок. При розмірах нанокристалів менших 30\AA потрібно застосовувати складні теорії, що базуються на мікроскопічно-статистичному підході.

Якісний прорив у технології отримання масивів квантових точок відбувся з використанням ефектів самоорганізації напівпровідникових наноструктур у гетероепітаксialьних напівпровідникових системах [12,16]. Такими методами були реалізовані практично ідеальні гетероструктури з квантовими точками з високою кристалічною

досконалістю та високою однорідністю за розмірами ($\sim 10\%$). Кристалічна досконалість на межі поділу забезпечується підбором "ідеальних пар" напівпровідникових матеріалів, для яких виконується багато умов сумісності теплових, електричних, кристалохімічних властивостей, а також кристалічної та зонної структур. Такими парами напівпровідників виявились GaP-GaAs, AlAs-GaAs, InGaAs-GaAs, β -HgS-CdS, більшість з яких вже досліджувались як плоскі гетеросистеми. Важливим для досконалості границь поділу таких пар напівпровідників є однакова симетрія кристалічної ґратки та малі різниці у величинах постійних ґратки. Наприклад, для кубічної модифікації кристалів HgS та CdS різниця у величинах постійних ґратки менша за 0,6%. Тому ці кристали у β -модифікації дозволяють отримати майже ідеальні гетерограниці, а квантові точки на їх основі зберігають правильні форми навіть при малих розмірах.

Отже в фізиці наносистем виявився цілий ряд задач в яких наноструктури виступають об'єктами сферичної симетрії. Фізична природа поведінки частинок в таких структурах ще повністю не вивчена. Особливо для квантових систем, які знаходяться в збудженому стані, тобто коли квантові числа квазічастинок більші нуля. Даний дипломний проект заповнює прогалину в цій області фізики наногетеросистем, що є **актуальною тематикою** в сьогодиншньому швидкоплинному процесі технічного розвитку людства.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами:

Дослідження та результати які представлені в магістерській кваліфікаційній роботі виконані згідно наукової тематики кафедри фізики по дослідженню фізики напівпровідників та систем низької розмірності в Житомирському державному університеті імені Івана Франка.

Метою роботи є: дослідити спектри електронів та дірок в сферичних квантових точках при нерівному нулю орбітальному квантовому числу.

Для досягнення поставленої мети виконані такі **завдання:**

1. Знайти розв'язок рівняння Шредінгера в центральнo-симетричному полі для сферичної квантової точки.
2. Дослідити спектр електрона у закритих та відкритих квантових точках.
3. Використовуючи теорії s-матриці та теорії спектра електронів та дірок для квантової точки з орбітальним числом $l=0$, розрахувати спектр тих же квазічастинок при $l \neq 0$.

Об'єктом дослідження: квантові точки HgS/CdS/HgS.

Предметом дослідження: енергетичні спектри електронів, дірок у відкритих та закритих квантових точках.

Методи дослідження: Енергетичні спектри квазічастинок розраховувалися шляхом аналітичного розв'язку стаціонарного рівняння Шредінгера в наближенні ефективних мас та прямокутних потенціальних бар'єрів. Для розрахунку збуджених станів електрона та дірок використовувалася теорія розсіювання S-матриці. Закон дисперсії та часи життя досліджувалися за допомогою програми комп'ютерного символьного числення Mathematica 8.

Практичне значення отриманих результатів:

Розвинута теорія дає можливість оцінити закон дисперсії електронів та дірок для сферичних наносистем при яких можливе експериментальне спостереження спектрів випромінювання, поглинання чи люмінесценції.

Апробація результатів магістерського проекту:

Результати роботи були апробовані на семінарах кафедри фізики Житомирського державного університету імені Івана Франка, кафедри теоретичної фізики Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича. А також деякі висновки отримані в роботі були опубліковані у вигляді статі [«Властивості квазістаціонарних станів електрона у відкритій сферичній квантовій точці», збірка «Науковий пошук молодих дослідників», випуск VII, ст.. 70], та доповідалися на конференціях: «Науковий пошук молодих дослідників».

1. Розв'язок рівняння Шредінгера у випадку сферичної симетрії

1.1. Рух у полі центральної сили. Радіальне рівняння Шредінгера

При дослідженні руху частинок у силових полях вирізняється важливий клас сферично-симетричних потенціалів, тобто потенціалів $U = U(r)$, які залежать лише від модуля радіус-вектора $r = |r|$. Наслідком центральної симетрії поля є те, що гамільтоніан частинки \hat{H} комутує з операторами квадрата моменту кількості руху \hat{L}^2 , його проекції \hat{L}_z та оператором інверсії \hat{L} . Це означає, що відповідні величини є інтеграла руху. Отже, $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$, $l = 1, 2, 3, \dots$, $L_z = \hbar m$, число m набуває $(2l+1)$ значень від $-l$ до $+l$, а парність хвильової функції $I = (-)^l$, тобто збігається з парністю числа l . Крім того, ці оператори комутують між собою і, отже, мають спільну систему власних функцій.

Важливо в цьому місці зазначити, що в класичній механіці задача про рух двох взаємодіючих між собою частинок зводиться до проблеми одного тіла. Те ж маємо й у квантовій механіці. Нехай ми маємо дві частинки з координатами r_1 та r_2 , маси яких є m_1 та m_2 . Далі нехай потенціальна енергія взаємодії $U = U(|r_1 - r_2|)$ залежить лише від відстані між ними. Гамільтоніан такої системи

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + U(|r_1 - r_2|) \quad (1.1)$$

де оператори імпульсів $\hat{p}_1 = -i\hbar\nabla_1$, $\hat{p}_2 = -i\hbar\nabla_2$. Уведемо нові змінні, а саме радіус-вектори центра мас та взаємної відстані:

$$R = \frac{m_1 r_1 + m_2 r_2}{m_1 + m_2}, \quad (1.2)$$

$$r = r_1 - r_2. \quad (1.3)$$

Перехід до нових змінних здійснюється стандартним чином. Наприклад,

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial X}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial x}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial X} - \frac{\partial}{\partial x}, \quad (1.4)$$

де X – компонента радіус-вектора R , а x – компонента вектора r . Аналогічно діємо й для інших компонент градієнта. У результаті маємо:

$$\nabla_1 = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \nabla_R - \nabla, \quad (1.5)$$

$$\nabla_2 = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \nabla_R + \nabla. \quad (1.6)$$

Тепер оператори імпульсів частинок

$$\hat{p}_1 = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \hat{P} - \hat{p}, \quad (1.7)$$

$$\hat{p}_2 = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \hat{P} + \hat{p}, \quad (1.8)$$

де $\hat{P} = -i\hbar \nabla_R$ – оператор імпульсу центра мас, $\hat{p} = -i\hbar \nabla$ – оператор імпульсу відносного руху частинок. Підставляючи ці вирази в гамільтоніан, знаходимо

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r), \quad (1.9)$$

де повна маса системи

$$M = m_1 + m_2, \quad (1.10)$$

а величину m , що визначається з рівняння

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}, \quad (1.11)$$

називають приведеною масою. Отже, гамільтоніан складається із суми двох незалежних частин. Перший доданок є оператором кінетичної енергії системи як цілого й описує вільний рух системи центра мас з хвильовою функцією вільної частинки

$$\varphi^P(R) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{iPR/\hbar}, \quad (1.12)$$

де P – повний імпульс системи. Два інших доданки описують відносний рух частинок із хвильовою функцією $\psi(r)$. Повна хвильова функція є їхнім добутком.

$$\psi(R, r) = \varphi P(R) \psi(r). \quad (1.13)$$

Підстановка цього виразу в стаціонарне рівняння Шредінгера

$$\hat{H} \psi = E \psi \quad (1.14)$$

приводить до рівняння для однієї частинки маси m з координатою r , що рухається в полі

$$U = U(r) : \left\{ \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r) \right\} \psi(r) = E' \psi(r), \quad (1.15)$$

де $E' = E - P^2 / 2M$ - енергія відносного руху частинок. Надалі, «сідаючи» на центр сам системи, ми будемо цікавитися лише відносним рухом, штрих з енергії E' для спрощення запису знімаємо. Як бачимо, це рівняння збігається з рівнянням Шредінгера для однієї частинки масою m з координатою r у полі центральної сили з потенціальною енергією $U(r)$. Тобто проблема двох тіл і у квантовій механіці зводиться до проблеми одного тіла.

У рівнянні Шредінгера

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r) \right\} \psi(r) = E \psi(r), \quad (1.16)$$

унаслідок сферичної симетрії потенціалу, зручно перейти від декартових координат x, y, z до сферичних координат r, θ, φ за відомими правилами.

Випишемо в нових координатах вираз для Лапласіана $\Delta = \nabla^2$.

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \quad (1.17)$$

Легко бачити, що вираз у квадратних дужках із точністю до множника $(-\hbar^2)$ є не що інше, як оператор квадрата моменту кількості руху \hat{L}^2 у сферичних координатах. Тепер рівняння Шредінгера запишеться так:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + U(r) \right\} \psi(r) = E \psi(r). \quad (1.18)$$

Змінні у рівнянні розділяються, і, відповідно до цього, хвильові функції зображуються як добуток функції $R(r)$, яка залежить лише від r , на хвильову функцію $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$, що залежить лише від кутових змінних і є власною функцією операторів \hat{L}^2 та \hat{L}_z :

$$\psi(r) = R(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi). \quad (1.19)$$

Функцію $R=R(r)$ називають радіальною функцією, для якої отримуємо рівняння

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (rR) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} R + U(r)R = ER. \quad (1.20)$$

Це рівняння називають радіальним рівнянням Шредінгера. Видно, що воно не містить власних значень $L_z = \hbar m$, отже, енергія не залежить від кратного числа m і ми маємо $(2l+1)$ -кратне виродження енергетичних рівнів.

«Історичний досвід» і сам вигляд рівняння підказують нам підстановку

$$rR(r) = \chi(r). \quad (1.21)$$

Для функції $\chi = \chi(r)$ отримуємо одновимірне рівняння Шредінгера

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + U_l(r) \right\} \chi = E \chi \quad (1.22)$$

з ефективною потенціальною енергією

$$U_l(r) = U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \quad (1.23)$$

за умови, що $0 \leq r < \infty$. Другий доданок у цьому виразі – відцентрова енергія, яка має відштовхувальний характер і не дозволяє частинці впасти на силовий центр.

Дослідимо поведінку функції χ на малих та великих відстанях. Почнемо з випадку $r \rightarrow 0$ і прийнемо, що при цьому $r^2 U \rightarrow 0$. Залишаючи в рівнянні для χ ведучі доданки, маємо

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \chi}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2mr^2} l(l+1) \chi = 0. \quad (1.24)$$

Шукаємо функцію χ у вигляді $\chi = \text{const} \times r^k$. Будемо вимагати, щоб $R = \chi/r \rightarrow 0$ при $r \rightarrow 0$. Рівняння для показника k :

$$-k(k-1) + l(l+1) = 0 \quad (1.25)$$

дає два розв'язки $k = -l$ та $k = l+1$. Перший розв'язок нефізичний – радіальна функція безмежно зростає при наближенні до початку координат (частинка «падає» на центр). Отже, залишається лише друге значення $k = l+1$:

$$\chi = \text{const} \times r^{l+1}, \quad r \rightarrow 0. \quad (1.26)$$

Нехай тепер $r \rightarrow \infty$. Залишаємо в рівнянні для χ головні члени:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \chi}{dr^2} = E \chi. \quad (1.27)$$

Розв'язок цього рівняння шукаємо у вигляді

$$\chi \sim e^{\alpha r}, \quad r \rightarrow \infty. \quad (1.28)$$

У результаті

$$\alpha = \pm \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}. \quad (1.29)$$

Якщо $E > 0$, маємо інфінітний рух з неперервними значеннями енергії. Величина α є уявною, тобто

$$\alpha = \pm i \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad (1.30)$$

і хвильова функція має осциляційний характер. Знак «плюс» відповідає сферичній хвилі, що поширюється від центра, знак «мінус» – хвилі, що збігається до центра.

Для зв'язаних станів $E < 0$, щоб забезпечити умову $R \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$, залишаємо одне значення

$$\alpha = -\sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}. \quad (1.31)$$

У результаті

$$\chi \sim \exp \left[-r \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} \right]. \quad (1.32)$$

Отже, для зв'язаних станів з урахуванням поведінки функції χ на малих та великих відстанях радіальну функцію записуємо у вигляді:

$$R(r) = r^l e^{-r \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}} \omega(r). \quad (1.33)$$

Такий запис забезпечує необхідну поведінку функції R на границях області значень $r, 0 \leq r < \infty$. Функція $\omega(r)$ відповідає за характер радіальної функції в області проміжних значень r , який, зрозуміло, диктується конкретним виглядом потенціальної енергії $U=U(r)$ [17].

1.2. Радіальне рівняння Шредінгера для сферичних квантових точок

Існувала проблема розв'язування рівняння Шредінгера зі змінною масою $m(r)$, оскільки ефективна маса квазічастинок у різних середовищах – різна. Форма оператора кінетичної енергії $T = \frac{\hbar^2}{2m(r)} \nabla_r^2$, із-за залежності m від r , уже не задовольняла вимогам квантової механіки. Для випадку плоскої границі поділу напівпровідників задача з координатно залежною ефективною масою квазічастинки розв'язувалась у роботах [18, 19], в яких вигляд ермітового оператора кінетичної енергії був наступний

$$T = \frac{\hbar^2}{2} \nabla_r \frac{1}{m(r)} \nabla_r. \quad (1.34)$$

За подібними міркуваннями, рівняння Шредінгера для радіальної частини хвильової функції квазічастинки у сферичній квантовій точці (0), вміщеній у середовище (1), що характеризується потенціальною ямою скінченної глибини

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r \leq R_0, \\ V_0, & r > R_0, \end{cases} \quad (1.35)$$

та ефективною масою

$$m(r) = \begin{cases} m_0, & r \leq R_0, \\ m_1, & r > R_0, \end{cases} \quad (1.36)$$

має такий вигляд

$$\left[-\frac{\hbar^2}{r^2} \frac{d}{dr} \frac{r^2}{m(r)} \frac{d}{dr} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{m(r)r^2} + V(r) \right] R_{n\ell}(r) = E_{n\ell} R_{n\ell}(r). \quad (1.37)$$

При цьому необхідно відмітити, що рівняння Шредінгера у вигляді (1.37) можна розв'язати точно, знаходячи його розв'язки окремо всередині квантової точки та у навколишньому середовищі

$$R_{n\ell}(r) = \begin{cases} R_{n\ell}^{(0)}, & r \leq R_0 \\ R_{n\ell}^{(1)}, & r > R_0 \end{cases}. \quad (1.38)$$

Умови зшивання на межі поділу середовищ матимуть вигляд

$$R_{n\ell}^{(0)} \Big|_{r=R_0} = R_{n\ell}^{(1)} \Big|_{r=R_0}, \quad (1.39)$$

$$\frac{1}{m_0} \frac{\partial R_{n\ell}^{(0)}}{\partial r} \Big|_{r=R_0} = \frac{1}{m_1} \frac{\partial R_{n\ell}^{(1)}}{\partial r} \Big|_{r=R_0}. \quad (1.40)$$

Перша умова забезпечує неперервність хвильової функції на межі гетеросистеми, а друга вимагає неперервності густини потоку ймовірності на границі поділу середовищ. Умова (1.40) відрізняється від стандартної граничної умови у випадку постійної маси і забезпечує, як це показано в роботах [18,19], відсутність нефізичних розривів у рівнянні Шредінгера.

Рівняння (1.37) у результаті підстановки (1.38) розпадається на два рівняння, в яких маса є постійною величиною. Отже, якщо у системі є лише одна квазічастинка, то у гамільтоніані враховується лише потенціальна енергія розмірного квантування. Тоді, форма оператора кінетичної енергії відносно запису ефективної маси не впливає на результати розрахунків. Коректний запис оператора кінетичної енергії принципово важливий у випадках наближених методів розрахунку, коли в потенціальну енергію включені інші взаємодії або поправки на

несферичність квантової точки. У таких випадках рівняння (1.37) не розщеплюється на два незалежних для кожної з областей розглядуваної системи і результати розрахунків будуть суттєво залежати від вигляду оператора кінетичної енергії.

У роботах [20, 21], досліджуючи спектри квазічастинок у рамках моделі зі скінченним потенціальним бар'єром на границі середовищ, автори для спрощення розрахунків, без обґрунтування, нехтують координатною залежністю ефективної маси в операторі кінетичної енергії. Так, у роботі [20], розраховуючи методом теорії збурень енергії зв'язку домішкових станів у сферичній квантовій точці GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs, розв'язано рівняння Шредінгера (1.37) при $m_0=m_1=m$ та $\ell = 0$.

2. Енергетичний спектр електрона у відкритих сферичних квантових точках

2.1. Розв'язок рівняння Шредінгера для відкритої сферичної квантової точки

Розглядається проста відкрита однобар'єрна квантова точка, яка складається з ядра-ями (0), шару-бар'єра (1) та середовища-ями (2). Геометрична схема системи та ефективна потенціальна енергія електрона та дірки в ній зображені на рис.2.1.б.

У сферичній системі координат з початком у центрі гетеросистеми електрон характеризується ефективною масою $m(r)$ і потенціальною енергією $U(r)$, які є функціями відстані від центру наносистеми, так як в різних середовищах вони мають різні значення

$$m(r) = \begin{cases} m_0, & r < r_0, r > r_1 \\ m_1, & r_0 \leq r \leq r_1 \end{cases} \quad U(r) = \begin{cases} 0, & r < r_0, r > r_1 \\ U_e, & r_0 \leq r \leq r_1 \end{cases}, \quad (2.1)$$

У зв'язку із залежністю ефективної маси від r , рівняння Шредінгера записується так

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \vec{\nabla} \frac{1}{m(r)} \vec{\nabla} + U(\vec{r}) \right) \Psi(r) = E \Psi(r) \quad (2.2)$$

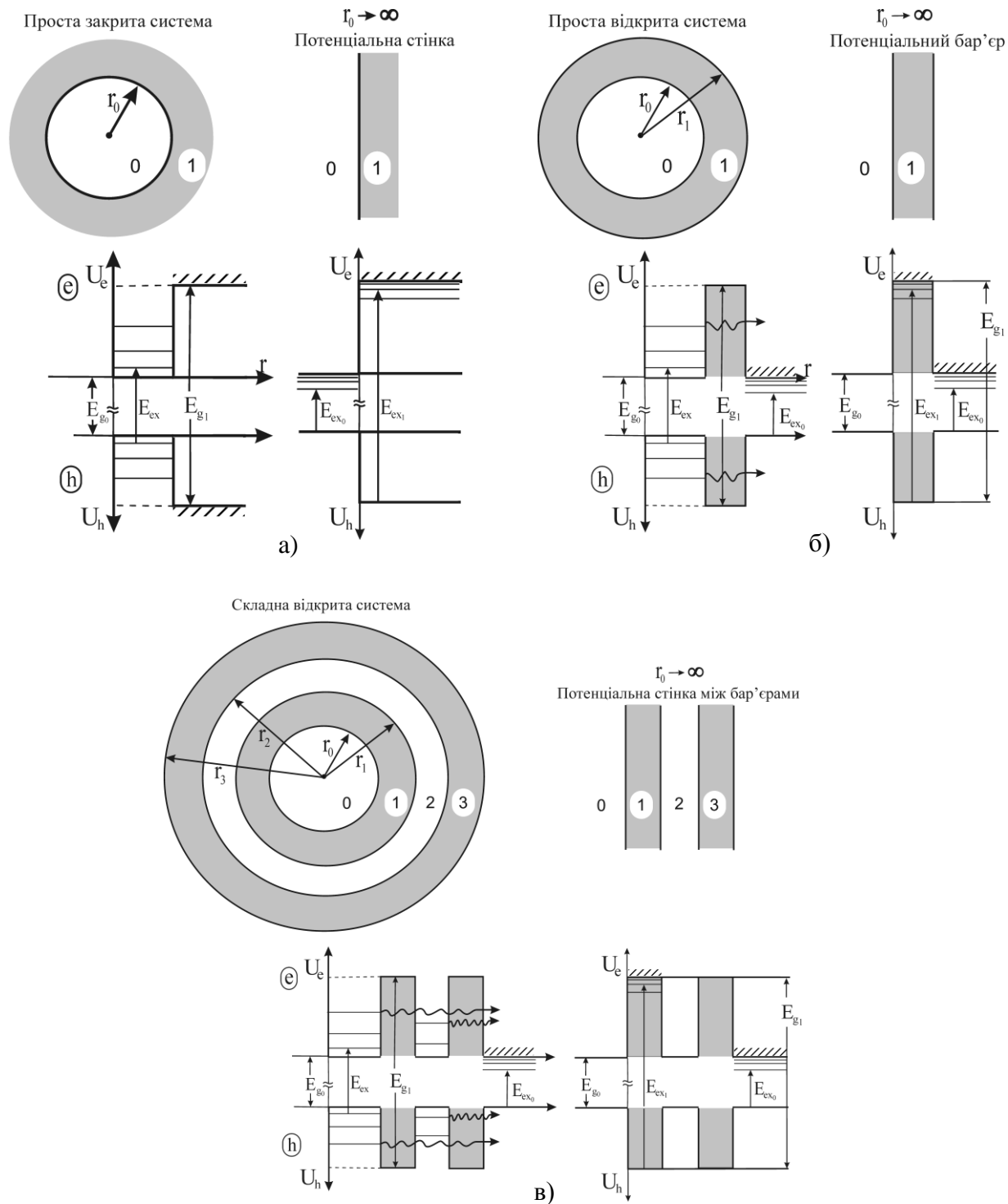


Рис.2.1 Геометричні та енергетичні схеми наногетеросистем.

З урахуванням сферичної симетрії його розв'язок шукаємо у вигляді

$$\Psi(\vec{r}) = R_\ell(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi), \quad \ell = 0, 1, 2, \dots; \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.3)$$

де $R_\ell(r)$ - радіальна хвильова функція.

$$R_{\ell}(r)=\begin{cases} R_{\ell}^{(0)}(r), & 0 \leq r < r_0 \\ R_{\ell}^{(1)}(r), & r_0 \leq r < r_1 \\ R_{\ell}^{(2)}(r), & r_1 \leq r < \infty \end{cases} \quad (2.4)$$

Підстановка (2.3) в (2.2) приводить до системи трьох однотипних рівнянь

$$\frac{\hbar^2}{2m_i r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_{\ell}^i(r)}{dr} \right) + (E - U(r)) R_{\ell}^i(r) = 0, \quad i = 0, 1, 2 \quad (2.5)$$

Подамо систему рівнянь (2.5) у вигляді:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_{\ell}^{(i)}}{dr} \right) + \left[K_i^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R_{\ell}^{(i)}(r) = 0, \quad (i=0,1,2) \quad (2.6)$$

де

$$K_i^2 = \frac{2m_i}{\hbar^2} (E - U_i) = \begin{cases} k^2, & i = 0, 2 \\ -\chi^2, & i = 1 \end{cases} \quad (2.7)$$

Розв'язками (2.6) є лінійні комбінації функцій Ханкеля від різних аргументів

$$\begin{aligned} R_{\ell}^{(0)}(r) &= k A_{\ell}^{(0)} [h_{\ell}^{-}(kr) + h_{\ell}^{+}(kr)] \\ R_{\ell}^{(1)}(r) &= K_i A_{\ell}^{(1)} [h_{\ell}^{-}(K_i r) - S_{\ell}^{(1)} h_{\ell}^{+}(K_i r)] \\ R_{\ell}^{(2)}(r) &= k A_{\ell}^{(2)} [h_{\ell}^{-}(kr) - S_{\ell}(k) h_{\ell}^{+}(kr)] \end{aligned} \quad (2.8)$$

Коефіцієнт $A_{\ell}^{(2)} = 1/\sqrt{2\pi}$, визначається з умови нормування радіальної хвильової функції [22]:

$$\int_0^{\infty} R_{\ell k}^{*}(r) R_{\ell k'}(r) r^2 dr = \delta(k - k') \quad (2.9)$$

Решта невідомих коефіцієнтів $A_{\ell}^{(i)}, S_{\ell}^{(1)}$ і матриця розсіювання S_{ℓ} однозначно визначаються з системи граничних умов:

$$\left. \begin{aligned} R_\ell^{(i)}(K_i r_i) &= R_\ell^{(i+1)}(K_{i+1} r_i) \\ \frac{1}{m_i} \frac{dR_\ell^{(i)}(K_i r)}{dr} \Big|_{r=r_i} &= \frac{1}{m_{i+1}} \frac{dR_\ell^{(i+1)}(K_{i+1} r)}{dr} \Big|_{r=r_i} \end{aligned} \right\}, \quad (i=0,1) \quad (2.10)$$

які забезпечують неперервність густини ймовірності і її потоку на обох межах гетеросистеми.

Система (2.10) розв'язується просто, звідки і визначається вираз для S_ℓ - який через громіздкість ми не приводимо, а для прикладу подамо лише порівняно простий вираз S_ℓ , наприклад, у випадку $\ell = 1$. Тоді

$$S_1(k) = e^{-2ikr_1} \frac{im_1(k^2 r_1^2 - 2(1 + ikr_1))\xi_2 + m_0(-i + kr_1)\xi_3}{im_1(k^2 r_1^2 - 2(1 - ikr_1))\xi_2 - m_0(i + kr_1)\xi_3}, \quad (2.11)$$

де

$$\xi_3 = e^{2\chi(r_1 - r_0)} \xi_1 (2 + \chi r_1 (-2 + \chi r_1)) - (2 + \chi r_1 (2 + \chi r_1)), \quad (2.12)$$

$$\xi_2 = e^{2\chi(r_1 - r_0)} \xi_1 (-1 + \chi r_1) + (1 + \chi r_1), \quad (2.13)$$

$$\xi_1 = \frac{(\sin(kr_0) - kr_0 \cos(kr_0))[m_0(2 + \chi r_0(2 + \chi r_0)) - 2m_1(1 + \chi r_0)] + m_1(1 + \chi r_0)kr_0 \sin(kr_0)}{(\sin(kr_0) - kr_0 \cos(kr_0))[m_0(2 + \chi r_0(-2 + \chi r_0)) + 2m_1(-1 + \chi r_0)] - m_1(-1 + \chi r_0)kr_0 \sin(kr_0)} \quad (2.14)$$

2.2. S-матриця розсіювання

S-матриця, сукупність величин, що описує процес переходу квантовомеханичних систем з одних станів в інші при їх взаємодії (розсіянні). Поняття «матриця розсіювання» введено німецьким фізиком В. Гейзенбергом в 1943 році.

При взаємодії система переходить з одного квантового стану, початкового, в іншого, кінцевого. Якщо позначити набір всіх квантових чисел, які характеризують початковий стан, через i , а кінцеве — через f , то амплітуда переходу, квадрат модуля якої визначає вірогідність даного процесу, може бути записана як S_{fi} . Сукупність амплітуд процесів утворює таблицю з двома входами (i — номер рядка, f — номер стовпця), яка і називається матрицею розсіювання S . Кожна амплітуда є елементом цієї матриці (матричним елементом). Набори квантових чисел i, f можуть містити

як безперервні величини (енергію, кут розсіювання і ін.), так і дискретні (орбітальне квантове число спіну, ізотопічний спін, масу і т. д.). У простому випадку системи дві безспінових частинки в нерелятивістській квантовій механіці стан визначається відносиним імпульсом частинки p ; тоді амплітуда процесу — амплітуда розсіювання є функцією двох змінних — енергії і кута розсіювання. У загальному випадку матриця розсіювання містить елементи, що відповідають як пружному розсіюванню, так і процесам перетворення і народження частинки. Квадрат модуля матричного елемента $|S_{fi}|^2$ визначає ймовірність відповідного процесу.

Знаходження матриці розсіювання — основне завдання квантової механіки і квантової теорії поля. Матриця розсіювання містить всю інформацію про поведінку системи, якщо відомі не тільки чисельні значення, але і аналітичні властивості її елементів; зокрема, її полюси визначають зв'язані стани системи. З основних принципів квантової теорії слідує найважливіша властивість матриці розсіювання — її унітарність. Воно виражається у вигляді співвідношення $SS^\dagger = 1$ (де S^\dagger — матриця ермітово зв'язана S , тобто $(S^\dagger)_{fi} = S_{if}^*$, де знак $*$ означає комплексне сполучення), або і відображає той факт, що сума ймовірностей процесів по всіх можливих каналах реакції повинна дорівнювати одиниці. Співвідношення унітарності дозволяє встановлювати важливі співвідношення між різними процесами, а в деяких випадках навіть повністю вирішити задачу. У релятивістській квантовій механіці існує напрям, в якому матриця розсіювання вважається первинною динамічною величиною; вимоги унітарності і аналітичності матриці розсіювання повинні служити при цьому основою побудови повної системи рівнянь, що визначають матрицю S .

3. Закон дисперсії електрона у сферичній квантовій точці HgS/CdS/HgS

3.1. Властивості квазістаціонарних станів електрона при $l = 0$ у відкритій сферичній квантовій точці (HgS/CdS/HgS)

Використовуючи вище приведену теорію і здійснивши відповідні числові розрахунки, виконаємо аналіз поведінки енергетичних рівнів (E_{nl}) і часів життя електрона та дірки (τ_{nl}) у станах з $\ell = 0$ у залежності від розміру ядра (r_0) при різних фіксованих товщинах (Δ) шару-бар'єра на прикладі сферичної наногетеросистеми $HgS/CdS/HgS$, фізичні параметри якої відомі (таблиця 3.1).

Таблиця 3.1.

	$m_e(m_0)$	$m_h(m_0)$	$a,(\text{\AA})$	$E_g,$ (eB)	$V_e,$ (eB)	$V_h,$ (eB)	$\Omega_L,$ (meB)	ε_∞	ε_0
CdS	0,2	0,7	5,818	2,5	3,65	6,3	57,2	5,5	9,1
HgS	0,036	0,044	5,851	0,5	5,0	5,5	27,8	11,36	18,2

Як видно з рис.3.1 енергетичні рівні електрона в потенціальній ямі (тонована область рис.3.1) зі збільшенням r_0 монотонно опускаються, зближаючись між собою, при цьому час життя в цих станах зростає експоненційно. Такі стани Брейт-Вігнерівського типу можна назвати сильно локалізованими квазістаціонарними станами. В області енергій вище потенціального бар'єру енергії (E_{n0}^e) та часи життя (τ_{n0}^e) електрона як функції r_0 мають немонотонний характер, при цьому спектр дискретний і зокрема спостерігається ефект розштовхування енергетичних рівнів ("пляшкові горла"). Причина цього явища зрозуміла з фізичних міркувань. Справді, якби всі три шари наногетеросистеми були ізольованими між собою безмежно високими і тонкими потенціальними бар'єрами, то електронні стани у них були б стаціонарними, а спектр був би неперервним у матеріалі

(2), дискретним і майже незалежним від r_0 у матеріалі (1) (короткі штрихові лінії рис.3.1), та дискретним і квадратично спадним зі збільшенням r_0 у матеріалі (0) (довгі штрихові лінії рис.3.1). Оскільки ж складові наногетеросистеми не ізольовані, то перебування електрона у обох внутрішніх шарах залишає скінченою ймовірність його виходу у відкритий зовнішній простір (2), що приводить до скінченості часу його перебування у внутрішніх шарах системи, а отже перетворює стани у квазістаціонарні. При цьому за законами квантової механіки у станах з однаковою симетрією при таких просторових параметрах обох внутрішніх шарів (0,1) системи, при яких енергії у них зближаються, виникає ефект розштовхування рівнів (“пляшкові горла”), що і спостерігаються на рис.3.1.

Так як збільшення товщини (Δ) шару (1) еквівалентне збільшенню ширини “невзаємодіючої” безмежно глибокої ями, то це викликає “опускання” спектру зі зближенням енергетичних рівнів між собою та збільшення часу життя електрона в цих станах. При цьому зрозуміло, що при достатньо великій товщині шару отримується майже неперевний спектр. І взагалі, якщо розглядати закриту наногетеросистему, то вище потенціального бар’єру утвориться неперевний спектр. Стани електрона вище потенціального бар’єру можна назвати слабо локалізованими квазістаціонарними станами, оскільки час життя електрона в цих станах на три порядки менший від часу життя сильно локалізованих станів типу Брейт-Вігнера.

Із аналізу енергетичного спектру видно, що кожній різко спадній ділянці відповідає характерний пік на залежності для часів життя. Це не випадково, оскільки при таких параметрах наносистеми електрон з більшою ймовірністю може перебувати в ядрі, від чого і збільшується час життя в цьому стані. Підтвердженням цього є побудова густини розподілу ймовірності електрона для стану 40 (рис.3.2).

Із рис.3.2 видно, що при тих розмірах ядра, де спостерігається характерний пік в залежності часів життя, електрон з’являється із більшою

ймовірністю в шарі-ямі наногетеросистеми. При локалізації електрона з найбільшою ймовірністю в шарі-бар'єрі, спостерігаються пологі ділянки в залежностях енергій і часів життя. Енергетичний спектр дірок (рис.3.3) аналогічний як і для електронів. Тільки для важчої дірки енергетичні рівні вище потенціального бар'єру швидше зближаються між собою і час життя в цих станах на порядок більший, ніж для електронів.

Аналіз густини розподілу ймовірності електрона (рис.3.2) і дірки (рис.3.4) показує, що при одній і тій же товщині ядра системи можлива локалізація електрона і дірки в різних шарах наносистеми, тобто якщо електрон (рис.3.2) з більшою ймовірністю з'являється в шарі-ямі при одних розмірах ядра, то дірка відповідно при інших (рис.3.4).

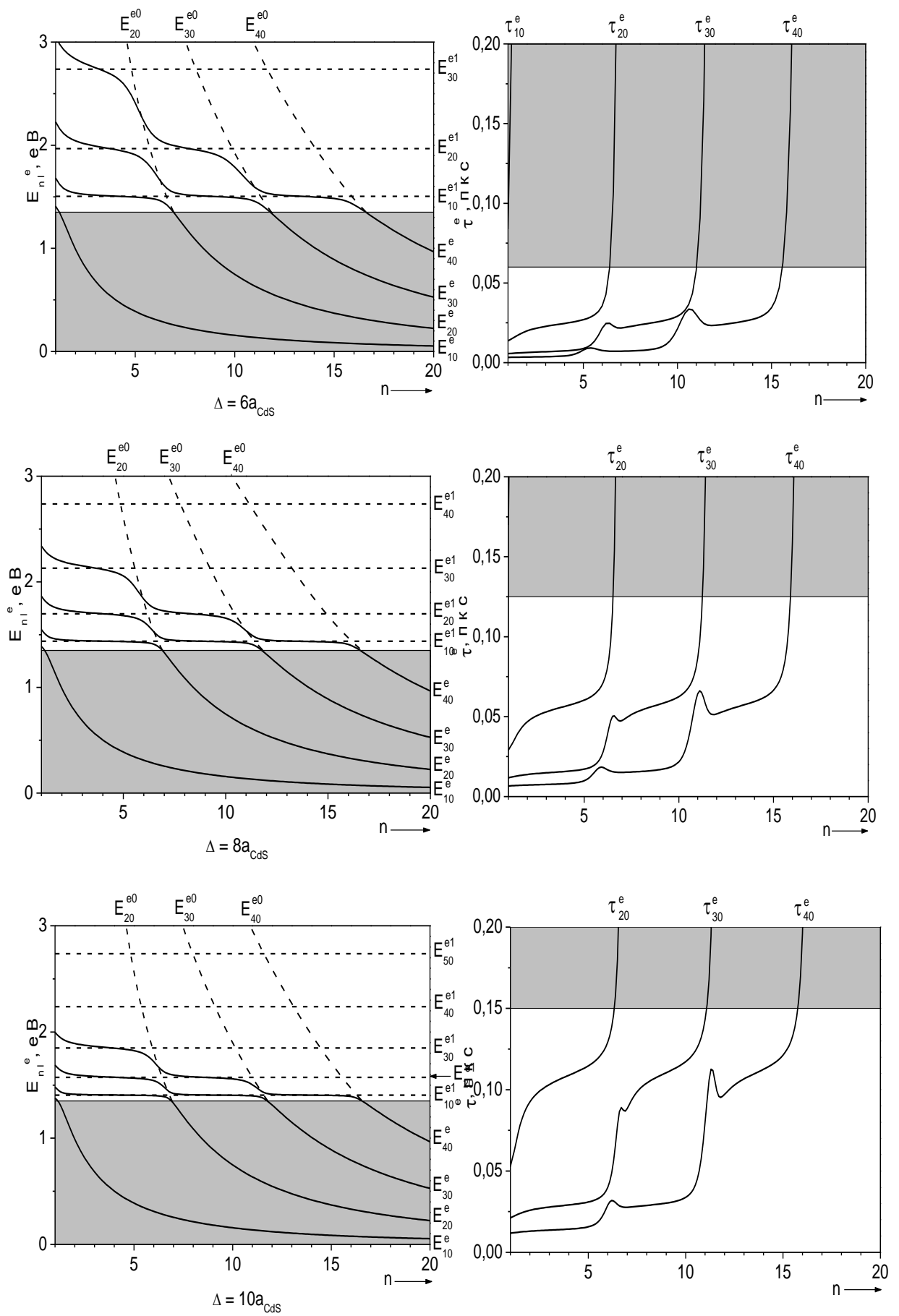


Рис.3.1 Залежності енергетичних рівнів і часів життя електрона від розміру ядра для різних розмірів шару-бар'єру Δ при $\ell = 0$.

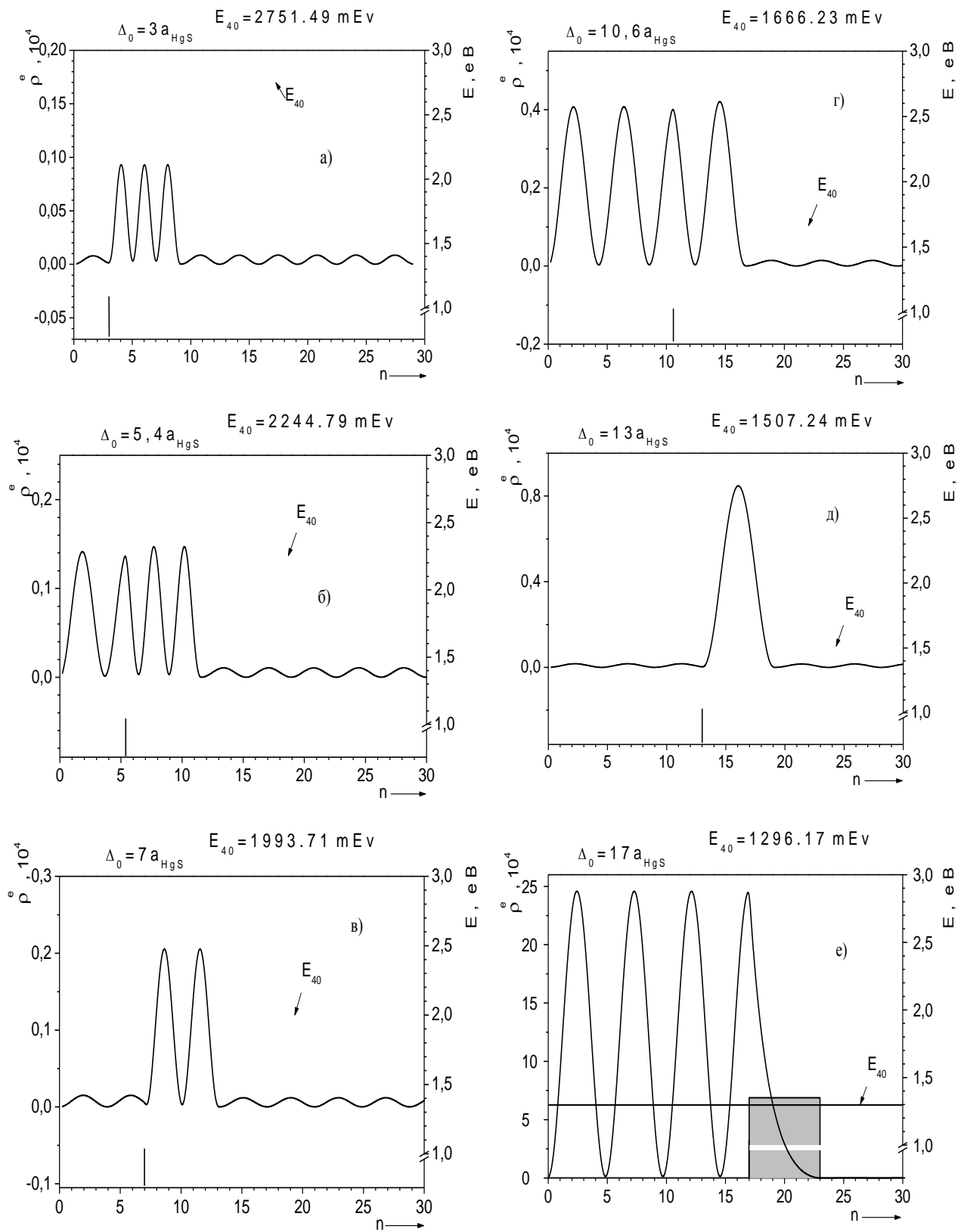


Рис.3.2 Розподіл густини ймовірності електрона в стані (40) при різних ширині шару-ядра Δ_0 наносистеми.

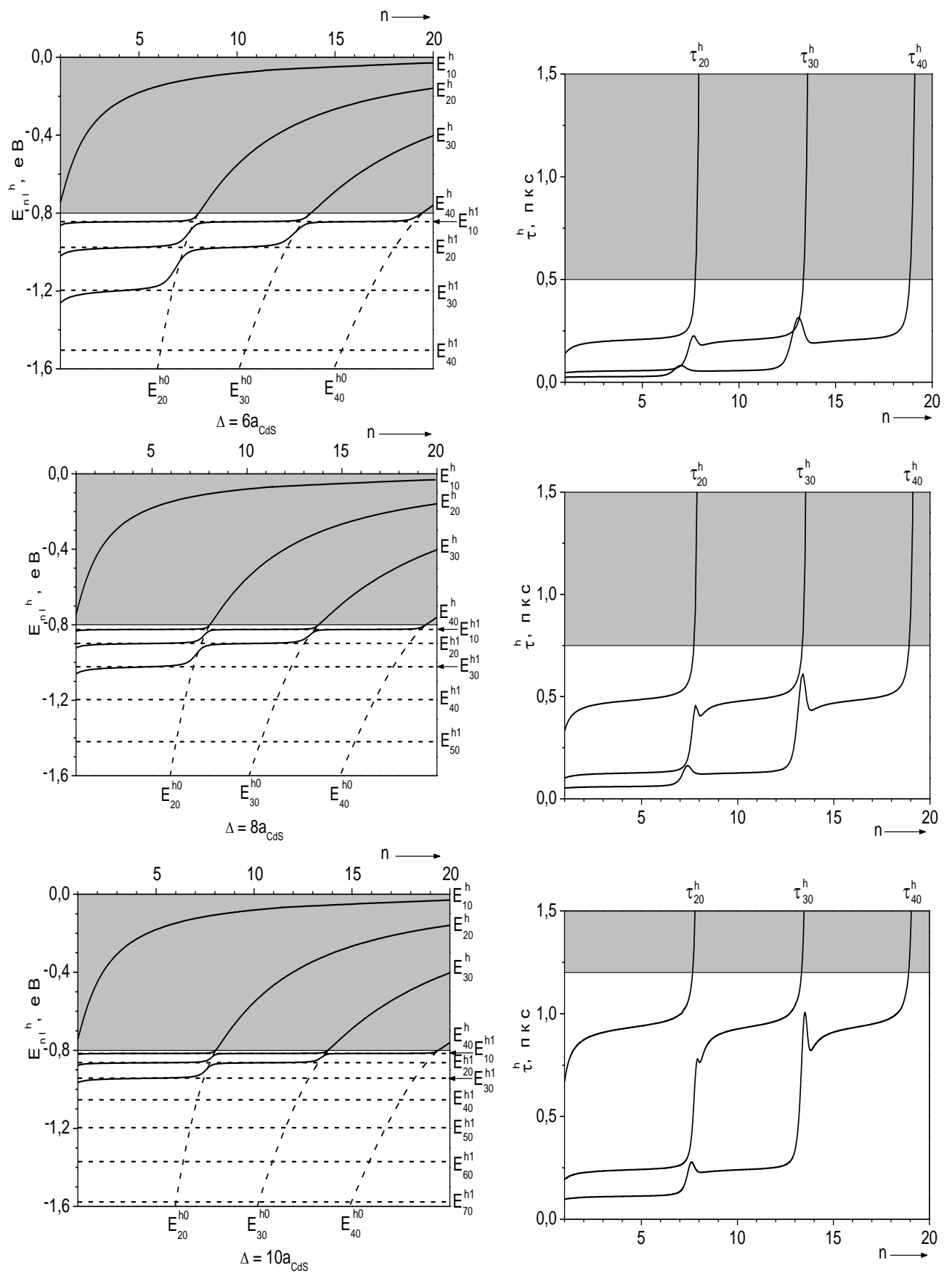


Рис.3.3 Залежності енергетичних рівнів і часів життя дірки від розміру ядра для різних розмірів шару-бар'єру Δ при $\ell = 0$.

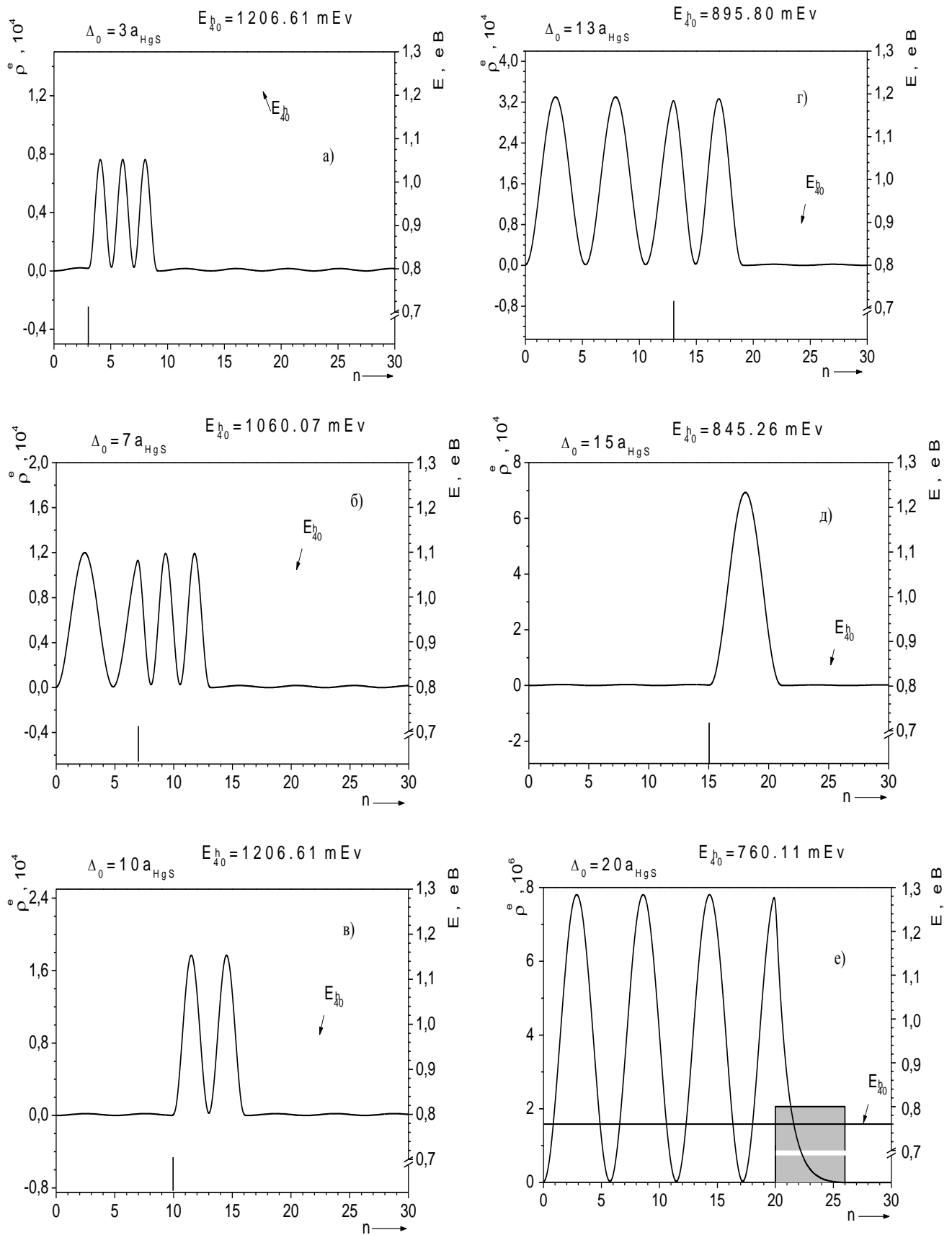


Рис 3.4 Розподіл густини ймовірності дірки в стані (40) при різному розмірі шару-ядра Δ_0 наносистеми.

3.2. Резонансні стани електронів та дірок при $L \neq 0$

Розглянемо квазістаціонарні стани електрона і дірки при $\ell \neq 0$. При цьому у сферичній системі координат з початком у центрі гетеросистеми електрон характеризується ефективною масою $m(r)$ і ефективною потенціальною енергією $U_{ef}^l(r)$, які є функціями відстані від центру наносистеми, так як в різних середовищах вони мають різні значення:

$$m(r) = \begin{cases} m_0, & r < r_0, r > r_1 \\ m_1, & r_0 \leq r \leq r_1 \end{cases}, \quad U_{ef}^{l \neq 0}(r) = U^{l=0}(r) + U_i^l(r), \quad (3.1)$$

де

$$U^{l=0}(r) = \begin{cases} 0, & r < r_0, r > r_1 \\ U_e, & r_0 \leq r \leq r_1 \end{cases}, \quad U_i^l(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_i r^2} \quad (3.2)$$

$U^{l=0}(r)$ - потенціальна енергія електрона. $U_i^l(r)$ - енергія відцентрового руху в i -му середовищі (рис. 3.5).

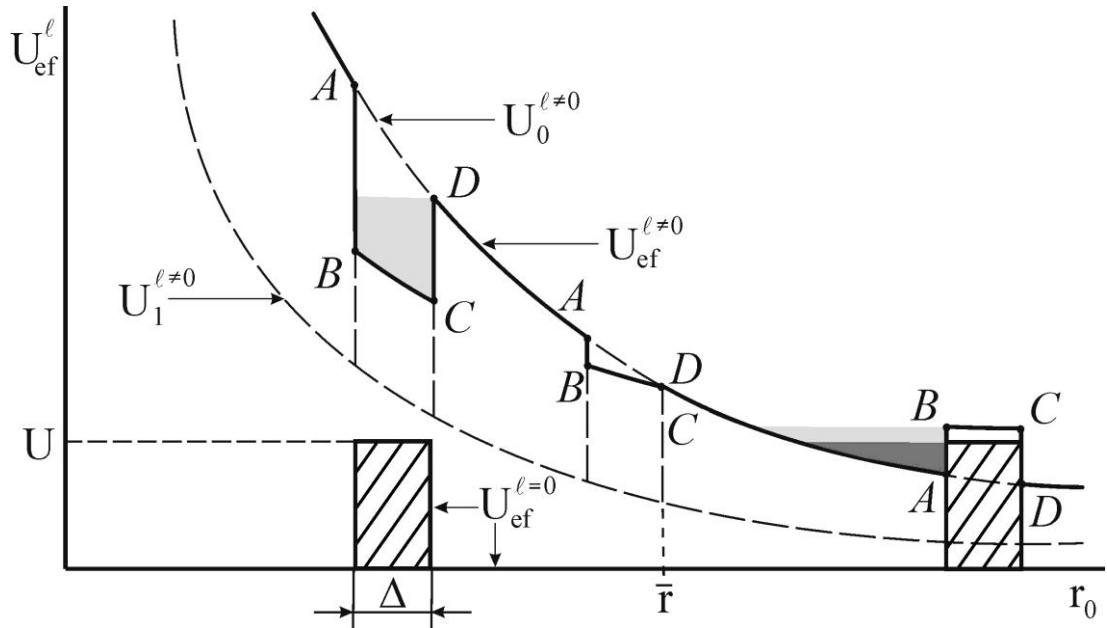


Рис.3.5 Схема ефективної потенціальної енергії електрона відкритої сферичної наногетеросистеми.

В даному випадку в рівнянні (2.6) стає відмінним від нуля доданок відцентрової енергії руху квазічастинок (3.2). Тому вигляд для ефективного потенціалу, в якому перебуває квазічастика в наносистемі набуває іншого вигляду (рис.3.5), ніж при $\ell = 0$. На цьому рисунку зображено залежності

енергій $U_i^\ell(r)$ відцентрового руху (при фіксованому значенні ℓ) як функцій відстані від центру наносистеми для двох середовищ (яма (0,2) і бар'єр (1)), що характеризується ефективними масами $m_0 = m_2$ та m_1 відповідно. Оскільки ефективна маса квазічастинок у середовищі-бар'єрі завжди більша, ніж у середовищі-ямі, то енергія відцентрового руху $U_i^\ell(r)$ в середовищі-бар'єрі менша, ніж в середовищі-ямі, то саме така ситуація відображена на рис.3.5. Тут також приведена залежність $U_{ef}^\ell(r)$ з якої видно, що в залежності від того, на якій відстані від центра відкритої СКТ розташований шар-бар'єр товщиною Δ , можуть виникати принципово різні квазістаціонарні стани електрона у наногетеросистемі.

Характерна відстань (\bar{r}) шару-бар'єру від центру наносистеми, яка поділяє вигляд ефективного потенціалу на три типи, визначається, як видно з рис.2.6, умовою

$$\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_0 r^2} = U + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_1 r^2} \quad (3.3)$$

звідки отримується величина \bar{r} :

$$\bar{r} = \sqrt{\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2U} \left(\frac{1}{m_0} - \frac{1}{m_1} \right)}. \quad (3.4)$$

Отже:

а) Якщо бар'єр розташований так, що радіус ядра наносистеми $r_0 > \bar{r} + \Delta$, то потенціальна яма на $U_{ef}^{\ell \neq 0}(r)$ утворюється в шарі-ядрі (права сильно і слабо тонована області на рис.3.5). Це означає, що у наносистемі можуть утворюватися зв'язані резонансні квазістаціонарні стани, у яких електрон локалізований у області ядра СКТ.

б) Якщо в системі радіус ядра наносистеми потрапляє у область $\bar{r} - \Delta \leq r_0 \leq \bar{r} + \Delta$, то у такій системі потенціальна яма взагалі відсутня, а отже в даному випадку у системі не можуть реалізовуватися резонансні, але слабо зв'язані квазістаціонарні стани. Такі стани доцільно називати майже

вільними квазістаціонарними станами, бо у них час життя електрона дуже малий, хоча і скінчений.

в) Якщо шар-бар'єр у наносистемі розташований так, що $r_0 < \bar{r} - \Delta$, то “яма” на $U_{ef}^l(r)$ утворюється в області цього шару (ліва слабо тонована область на рис.3.5), де і локалізуються зв'язані резонансні квазістаціонарні стани.

При цьому область енергії тепер можна розділі на три типи: область, в якій квазістаціонарні стани квазічасток будуть сильно локалізованими типу Брейт-Вігнера (сильно тонована ділянка), область, в якій при відсутності потенціальної ями квазістаціонарні стани будуть майже вільними із дуже малим часом життя, і область, в якій при наявності ефективної потенціальної ями, квазістаціонарні стани електрона будуть слабо зв'язаними (слабо тонована ділянка), час життя яких значно більший, ніж у майже вільних квазістаціонарних станах.

Зрозуміло, що така “екзотична” можливість існування відкритих систем з локалізацією електронів у шарі-бар'єрі зумовлена суто тією обставиною, що $m_1 > m_0$. У протилежному випадку ($m_1 \leq m_0$) такі стани абсолютно неможливі.

Аналізуючи квазістаціонарні стани квазічасток при $\ell = 1$ рис.3.6, можна провести повну аналогію до спектрів і залежностей часів життя при $\ell = 0$, де єдиною відмінністю є те що енергетичні рівні квазічасток при $\ell = 1$ знаходяться вище і час життя у відповідних станах менший, при цьому якісна залежність однакова рис.3.7.

Цікавими є стани квазічасток при більших значеннях ℓ . Проаналізуємо енергетичні спектри і часи життя в цих станах квазічасток при $\ell = 7$ рис.3.8. Видно, що в області, де стани електрона сильно локалізовані (сильно тонована ділянка), спектр монотонно спадний і час життя в цих станах великий та експоненційно зростає із збільшенням ширини ядра наносистеми. В області, де стани електрона слабо локалізовані в шарі-бар'єрі (слабо

тонована область), залежність енергетичних рівнів аналогічна, тобто монотонно спадають із збільшенням ядра наносистеми, при цьому часи життя в цих станах не збільшуються, а зменшуються, оскільки зменшується ефективна потенціальна яма. І нарешті в області, де стани електрона є майже вільними квазістаціонарними (не тонована область), спостерігається ефект розштовхування енергетичних рівнів, оскільки електрон при певних параметрах наносистеми локалізується в різних її шарах. Аналіз спектрів і часів життя для дірок аналогічний (рис.3.9).

Загальні висновки такі. У цьому розділі методом матриці розсіювання S_ℓ виконано дослідження особливостей енергетичного спектру та часу життя електрона в станах з довільним значенням ℓ . Головним висновком є те, що при скінчених розмірах зовнішнього шару-бар'єру (рис.2.1б,в) спектр квазічастинок в області вище потенціального бар'єру перестає бути неперервним і набуває дискретного характеру, а стани зі стаціонарних перетворюються у квазістаціонарні. В залежності від того на якій відстані від центру наносистеми знаходиться шар-бар'єр при $\ell \neq 0$ потенціальна яма може утворюватися як в шарі-ядрі, так і в шарі-бар'єрі або взагалі зникає. Цей ефект виникає через велику різницю ефективних мас в різних середовищах при достатньо великих ℓ . При цьому квазічастинки можуть перебувати в станах трьох різних типів: сильно локалізовані квазістаціонарні стани квазічасток типу Брейт-Вігнера (потенціальна яма в шарі-ядрі), майже вільні квазістаціонарні стани, (потенціальна яма відсутня), слабо зв'язані резонансні квазістаціонарні стани (потенціальна яма в шарі-бар'єрі).

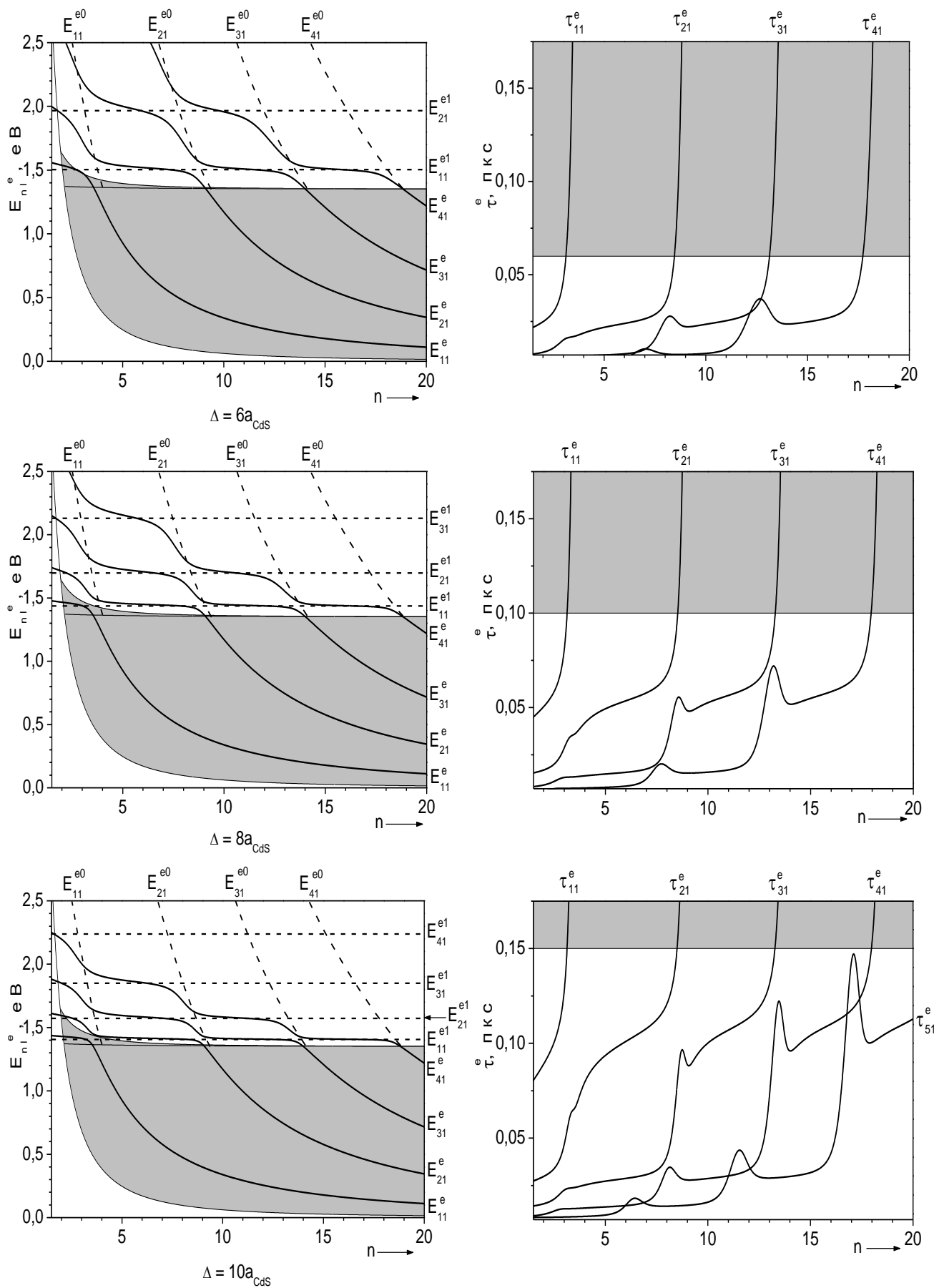


Рис.3.6 Залежності енергетичних рівнів і часів життя електрона від розміру ядра для різних розмірів шару-бар'єру Δ при $\ell = 1$.

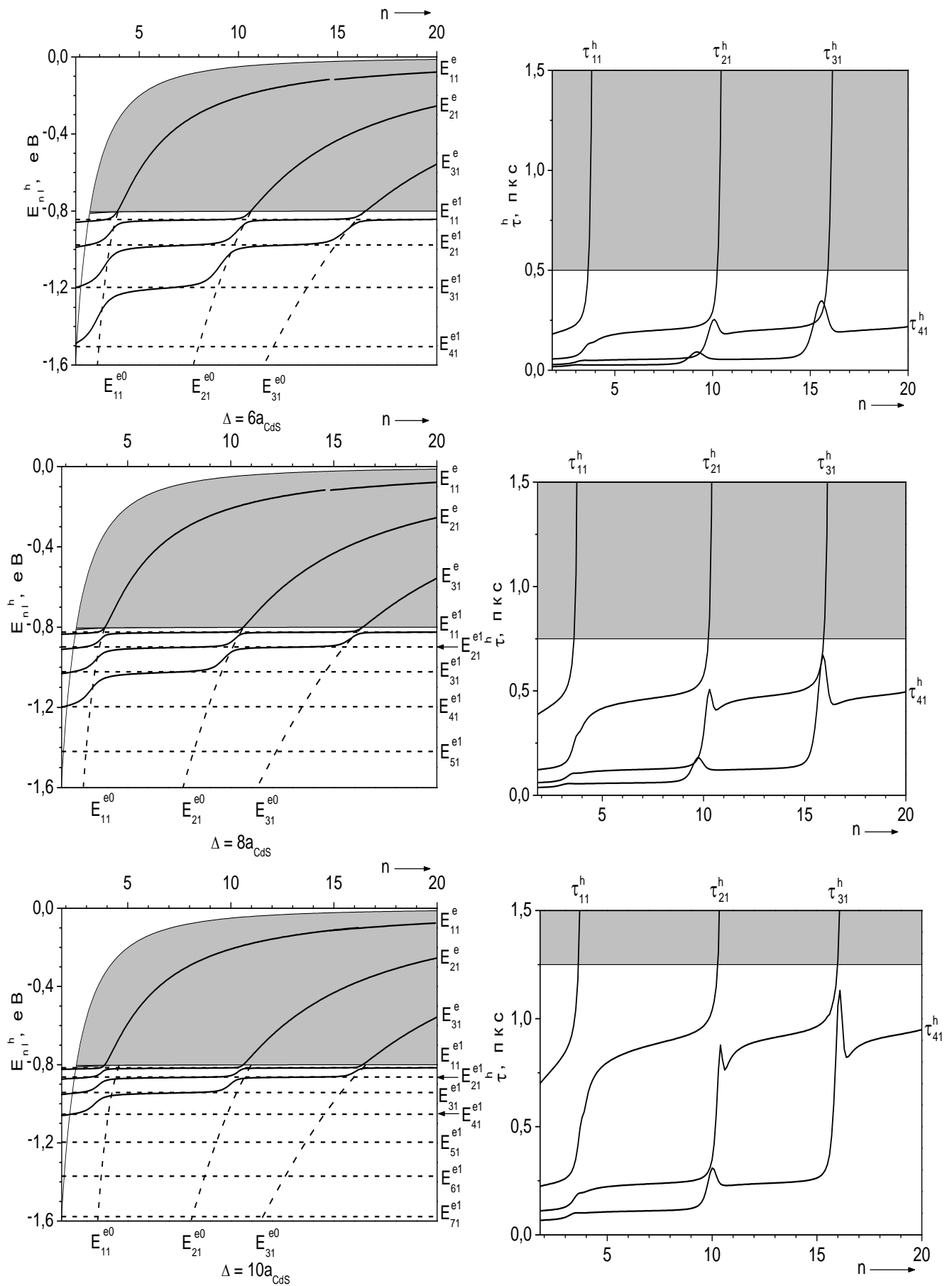


Рис.3.7 Залежність енергетичних рівнів і часів життя дірки від розміру ядра для різних розмірів шару-бар'єру Δ при $\ell=1$.

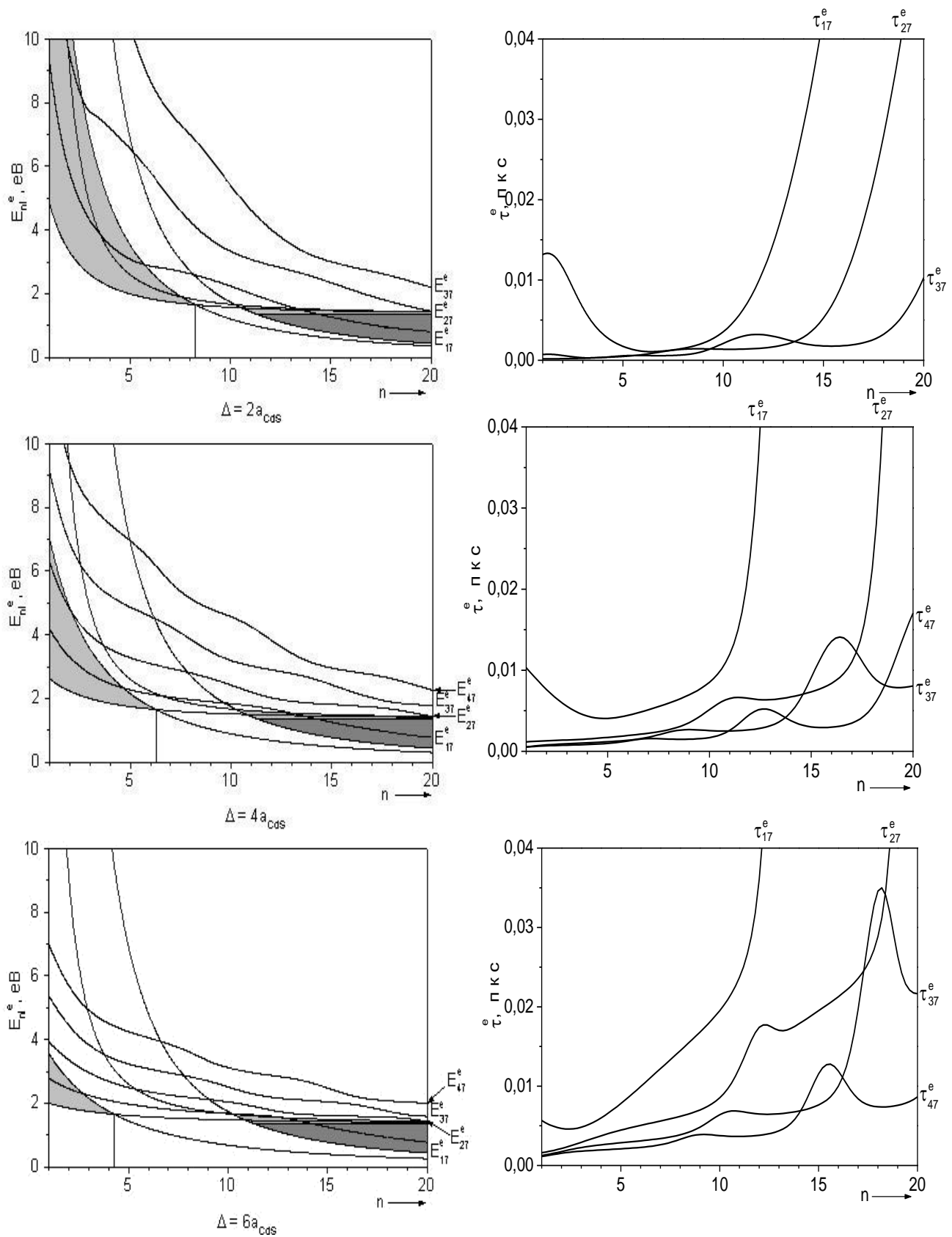


Рис.3.8 Залежності енергетичних рівнів і часів життя електрона від розміру ядра для різних розмірів шару-бар'єру Δ при $\ell = 7$.

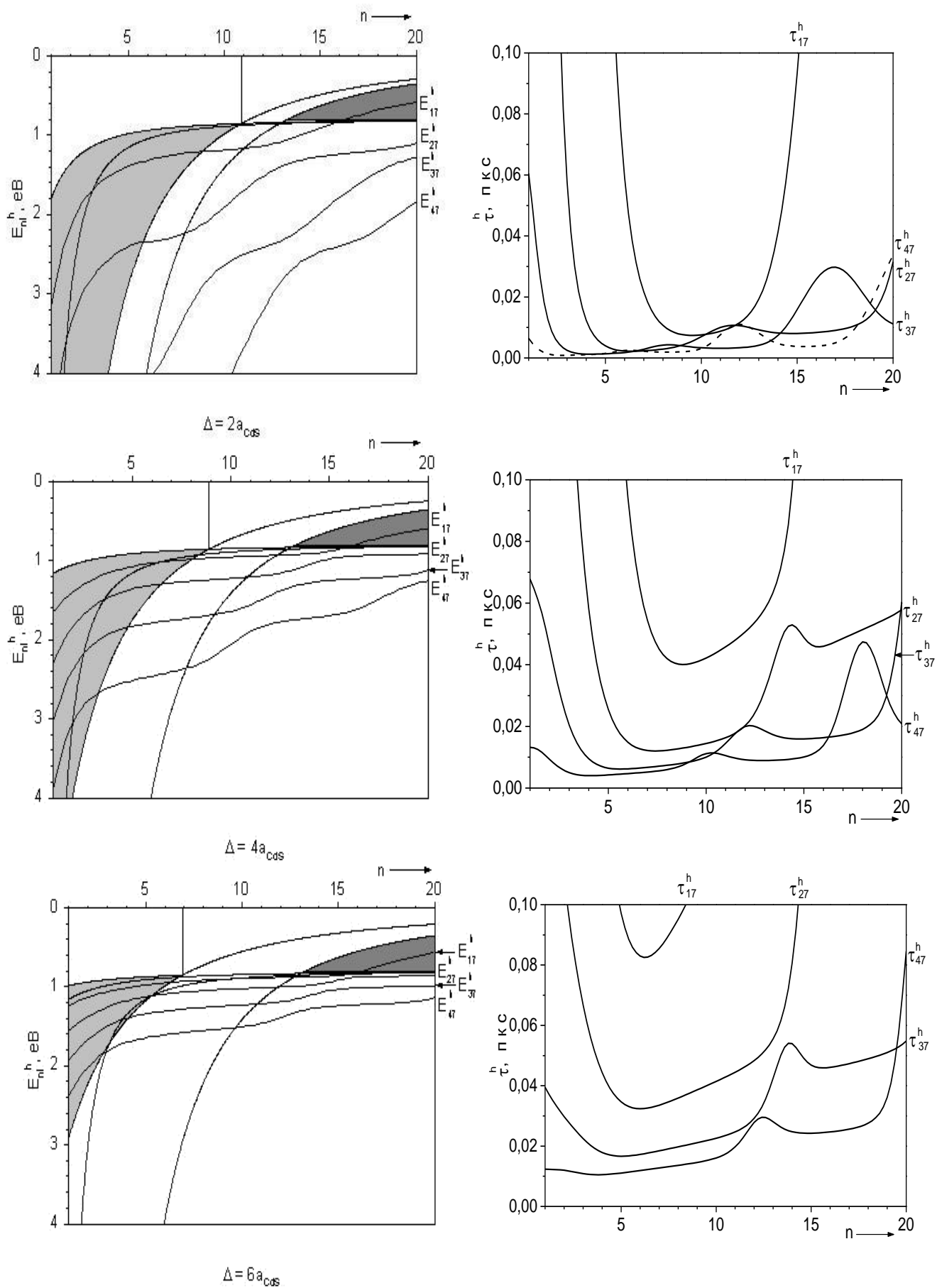


Рис. 3.9 Залежності енергетичних рівнів і часів життя дірки від розміру ядра для різних розмірів шару-бар'єру Δ при $\ell = 7$

Висновки

Знайдено загальний розв'язок рівняння Шредінгера в центральнo-симетричному полі для сферичної квантової точки.

Досліджено спектр електрона у закритих та відкритих квантових точках. Показано залежність висоти енергетичного рівня електрона та дірки від ширини квантової ями.

З допомогою теорії s-матриці та теорії спектра електронів та дірок для квантової точки з орбітальним числом $l=0$, розраховано спектр тих же квазічастинок при $l \neq 0$. Показано що із збільшенням товщини шару-бар'єру енергія електрона (дірки) практично не змінюється на відміні від часу життя. Який зростає при збільшенні товщини бар'єру.

Крім того показано, що із збільшенням ширини квантової ями енергетичні рівні як електрона так і дірки з вищим значенням квантового числа « l » втягуються і опускаються на дно квантової ями.

Список використаної літератури

1. Екимов А.И., Онущенко А.А., Цехомский В.А.// Физика и химия стекла. – 1980. – Т.6 – С.511.
2. Екимов А.И., Онущенко А.А. Квантовый размерный эффект в трехмерных микрокристаллах полупроводников // Письма в ЖЭТФ. – 1981. – Т.34. – № 6. – С.363-366.
3. Ткач М.В., Головацький В.А., Березовський Я.М. Спектр і хвильові функції водневоподібної домішки, розміщеної, в центрі квантової точки. // Фізика і хімія твердого тіла, - 2003. – Т.4. - №2.- С.213-220.
4. Tkach M.V., Holovats'ky V.A., Berezovs'ky Y.M., Makhanets' O.M., Val' O.D. Electron and exciton spectra in opened nanoheterosystems // Proceedings International Conference on Advanced Optoelectronics & Lasers, - 2003, V.1, - P8-13.
5. Екимов А.И., Онущенко А.А. Квантовый размерный эффект в оптических спектрах полупроводниковых кристаллов // ФТП. - 1982. - Т.16. - № 7. - С.1215-1219.
6. Екимов А.И., Онущенко А.А., Плюхин А.Г., Эфрос А.Л. Размерное квантование экситонов и определение параметров их энергетического спектра в CuCl // ЖЭТФ. – 1985. – Т.88. - №4 – С.1490-1501.
7. Ekimov A.I., Efros A.L., Onuschenko A.A. Quantum size effect in semiconductor microcrystals // Sol. Stat.Comm. – 1985. – V.56. - №11 – P. 921-924.
8. Itoh T., Iwabuchi Y., Kikihara T. Size-quantized excitons in microcrystals of cuprous halides embedded in alkali – halide matrices // Phys. Stat. Sol. B. – 1988/ - V. 146. – N 2. – P.531-545.
9. Rossetti R., Nakahara S., Brus L.E. Quantum size effects in the redox potentials, resonance Raman spectra and electronic spectra of CdS crystallites in aqueous solution // J. Chem. Phys. – 1983. – V. 79. - № 2. – P.1086-1088.

10. Екимов А.И., Онущенко А.А. Размерное квантование энергетического спектра электрона в микрокристаллах полупроводников // Письма в ЖЭТФ. – 1984. – Т.40. – № 8. – С.337-340.
11. Delley B, Steigmeier Quantum confinement in Si nanocrystals // Phys. Rev. B – 1993. – V.47. – № 3. – P.1397-1340.
12. Алферов Ж.И. История и будущее полупроводниковых гетероструктур // ФТП. - 1998. - Т.32. - N1. - С.3-18.
13. Эфрос Ал.Л., Эфрос А.Л. Межзонное поглощение в полупроводниковом шаре // ФТП. – 1982. – Т.16. - №. – С.1209-1214.
14. Brush L.E. A simple model, for the ionization potential electron affinity and aqueous redox potentials of small semiconductor crystallites // J. Chem. Phys. – 1983. – V. 79. - № 11. – P.5566-5571.
15. Delerue C., Allan G., Lannoo M. Theoretical aspects of the luminiscence of porous silicon// Phys. Rev. B – 1993. – V.48. – №15. – P.11024-11036.
16. Леденцов Н.Н., В.М. Устинов, В.А. Щукин, П.С. Копьев, Ж.И. Алфёров, Д.Бимберг Гетероструктуры с квантовыми точками: получение, свойства, лазеры. Обзор. // ФТП. – 1998. – Т.32. – №4. – С.385-410.
17. Вакарчук І.О. Квантова механіка: Підручник.-Львів: ЛДУ ім. І. Франка, 1998. – 616 с.: 73 іл. – С.269-274.
18. Read A.J., Needs R.J., Nash K.J., Canham L.T., Calcott P.D.J., Qteish A. First-principles calculations of the electronic properties of silicon quantum wires// Phys. Rev. Lett. – 1992. – V.69. – №8. – P.1232-1235.
19. Yung K.C., Yee J.H. Derivation of the modified Schrodinger equation for a particle with a spatially varying mass through path integrals// Phys. Rev. A – 1994. – V.50. – №1. – P.104-106.
20. Morrow R. A., Brownstein K. R. Models effective-mass Hamiltonians for abrupt heterojunctions and the associated wave-function-matching condition// Phys. Rev. B – 1984. – V.30. – №2. – P.678-680.

21. Balian R., Bessis D., and Mezincescu G. A. Form of kinetic energy in effective-mass Hamiltonians for heterostructures// Phys.Rev. B. – 1995. - V.51, №24. - P.17624-17629.

22. Базь А.И., Я.Б. Зельдович, А.М. Переломов Рассеяния, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. – М.: Наука, 1971. - 463с.

Додатки

Код програми розрахунку спектра електрона та дірки для сферичної квантової точки в середовищі Wolfram Research Mathematica 8.0.

Рівняння Шредінгера для кожної з областей простору, де потенціальна енергія постійна має наступний вигляд

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu_i} \chi_i''[r] + \left(U_i + \frac{\hbar^2}{2\mu_i} \frac{L(L+1)}{r^2} \right) \chi_i[r] = \varepsilon \chi_i[r]$$

Перейдемо до у рівнянні Шредінгера до безрозмірних координат та енергії:

координата $r = \frac{r}{a}$, де $a = 0,529 \text{ \AA}$ - радіус Бора;

енергія $E_n = \frac{\varepsilon}{R_y}$, де $R_y = \frac{\hbar^2}{2\mu a^2} = 13,605 \text{ eV}$

потенціальна енергія $V_i = \frac{U_i}{R_y}$

$\mu_i = \mu m_i$, де μ - маса вільного електрона.

У результаті отримаємо наступні рівняння для кожного шару

$$\text{riv} = \chi_i''[r] + \left(m_i (E_n - V_i) - \frac{L(L+1)}{r^2} \right) \chi_i[r] == 0$$

$$\left(-\frac{L(L+1)}{r^2} + m_i (E_n - V_i) \right) \chi_i[r] + \chi_i''[r] == 0$$

Уведемо величину k_i для кожної області простору

$$E_n = V_i + \frac{k_i^2}{m_i}$$

Отримаємо три диференціальні рівняння для кожної області простору, у яких врахуємо наступні співвідношення

$$V_0 = V_2 = 0, \quad V_1 = V, \quad k_0 = k_2 = k = \sqrt{m_0 E_n} \\ k_1 = \kappa = \sqrt{m_1 (E_n - V)} = i \sqrt{m_1 (V - E_n)} = i \quad \kappa$$

$i = 0; V_0 = 0; \quad k_0 = k; \quad \text{riv0} = \text{FullSimplify}[\text{riv}]$

$i = 1; V_1 = V; \quad k_1 = \kappa; \quad \text{riv1} = \text{FullSimplify}[\text{riv}]$

$i = 2; V_2 = 0; \quad k_2 = k; \quad \text{riv2} = \text{FullSimplify}[\text{riv}]$

$$\left(k^2 - \frac{L(L+1)}{r^2} \right) \chi_0[r] + \chi_0''[r] == 0$$

$$\left(-\frac{L(L+1)}{r^2} + \kappa^2 \right) \chi_1[r] + \chi_1''[r] == 0$$

$$\left(k^2 - \frac{L(L+1)}{r^2} \right) \chi_2[r] + \chi_2''[r] == 0$$

Розв'яжемо систему диф. рівнянь відносно хвильових функцій у кожній області простору.

$\text{roz} = \text{DSolve}[\{\text{riv0}, \text{riv1}, \text{riv2}\}, \{\chi_0[r], \chi_1[r], \chi_2[r]\}, r]$

З отриманих розв'язків побудуємо функціональні залежності

```

X0[r_] = X0[r] /. roz[[1, 1]]
X1[r_] = X1[r] /. roz[[1, 2]]
X2[r_] = X2[r] /. roz[[1, 3]]

 $\sqrt{r}$  BesselJ[ $\frac{1}{2}(1+2L), kr$ ] C[1] +  $\sqrt{r}$  BesselY[ $\frac{1}{2}(1+2L), kr$ ] C[2]

 $\sqrt{r}$  BesselJ[ $\frac{1}{2}(1+2L), rk$ ] C[3] +  $\sqrt{r}$  BesselY[ $\frac{1}{2}(1+2L), rk$ ] C[4]

 $\sqrt{r}$  BesselJ[ $\frac{1}{2}(1+2L), kr$ ] C[5] +  $\sqrt{r}$  BesselY[ $\frac{1}{2}(1+2L), kr$ ] C[6]

```

З розкладу видно, що хвильова функція рівна нулю в т. $r=0$ лише у випадку, коли $C[2]=0$. Підставимо це значення у вираз для хвильової функції

```

X0[r_] = X0[r] /. {C[2] -> 0}

 $\sqrt{r}$  BesselJ[ $\frac{1}{2}(1+2L), kr$ ] C[1]

```

Перейдемо від циліндричних функцій Бесселя до сферичних.

Вони зв'язані між собою співвідношеннями

$$\text{besj}[L_, z_] = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} \text{BesselJ}\left[\frac{1}{2}(1+2L), z\right],$$

$$\text{neim}[L_, z_] = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} \text{BesselY}\left[\frac{1}{2}(1+2L), z\right],$$

які будуть уведені пізніше для спрощення отриманої матриці розсіювання.

А запропонований перехід здійснимо методом правил підстановки

```

pids = {BesselJ[ $\frac{1}{2}(1+2L), kr$ ] ->  $\sqrt{\frac{2kr}{\pi}}$  besj[L, kr],

BesselY[ $\frac{1}{2}(1+2L), kr$ ] ->  $\sqrt{\frac{2kr}{\pi}}$  neim[L, kr],

BesselJ[ $\frac{1}{2}(1+2L), rk$ ] ->  $\sqrt{\frac{2kr}{\pi}}$  besj[L, kr],

BesselY[ $\frac{1}{2}(1+2L), rk$ ] ->  $\sqrt{\frac{2kr}{\pi}}$  neim[L, kr]};

```


Від сферичних функцій Бесселя перейдемо до сферичних функцій Ханкеля

$$h^+[L, z] = \text{besj}[L, z] + I \text{ neim}[L, z]$$

$$h^-[L, z] = \text{besj}[L, z] - I \text{ neim}[L, z]$$

також методом правил підстановки

```

bh = {besj[L, kr] -> (h^+[L, kr] + h^-[L, kr]) / 2,
      neim[L, kr] -> (h^+[L, kr] - h^-[L, kr]) / 2 / I,
      besj[L, kr] -> (h^+[L, kr] + h^-[L, kr]) / 2,
      [L, kr] -> (h^+[L, kr] - h^-[L, kr]) / 2 / I}

```

Від коефіцієнтів C[1], C[3] - C[6] перейдемо до коефіцієнтів $A_i(k)$ та S - матриць $S_1(k)$ і $S(k)$, записавши розв'язок через лінійну комбінацію збіжної та розбіжної хвиль $\chi^{(-)}[r] = -i k r h^-$, $\chi^{(+)}[r] = i k r h^+$.

```

X0[r_] = A0 r (h^-[L, kr] + h^+[L, kr])
X1[r_] = A1 r (h^-[L, kr] + S1 h^+[L, kr])
X2[r_] = A2 r (h^-[L, kr] + S h^+[L, kr])

```

```

rA0 (h^-[L, kr] + h^+[L, kr])

```

```

rA1 (h^-[L, kr] + S1 h^+[L, kr])

```

```

rA2 (h^-[L, kr] + S h^+[L, kr])

```

```

V = 1350;
Ry = 13605;
m0 = 0.036;
m1 = 0.2;
aRgs = 5.852;
aCas = 5.818;
ab = 0.529;
r0 = 15 aRgs / ab;
rho := 2 aCas / ab;
r1 := r0 + rho

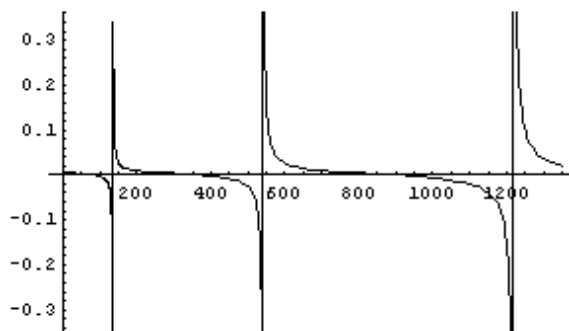
```

Перетини функцій $fr[e]$ з віссю Oх відповідають енергіям зв'язаних станів.
Для точного знаходження коренів необхідно задати початкове наближення,
близьке до того кореня, який нас цікавить .

```

Plot[fr[e], {e, 0, V}]; kor = FindRoot[fr[e] == 0, {e, 50}]; en = e /. kor

```



Матриця розсіювання $Sm[e]$ описує найпростішу відкриту сферичну систему, яка складається з ядра HgS радіуса r_0 , оболонки CdS товщиною $r_1 - r_0$ і зовнішнього середовища HgS . З попередніх формул видно, що вираз для S матриці є комплексним, тому полюси будемо шукати у комплексній площині енергій. За початкове наближення слугуватимуть положення енергій зв'язаних станів відповідної закритої системи.

```
Rez = FindRoot[1 / Sm[e] == 0, {e, en}]
```

```
{e -> 84.942 - 0.117527 i}
```

```
En = Re[e /. Rez]
```

```
Tim = 1.055 / 1.6 / 2 / Im[-e /. Rez]
```

```
84.942
```

```
2.80522
```

```

$$\tau[e] = \frac{1.055}{1.6 \Gamma[e]} ;$$

```

```

$$\Gamma[e] = (16 e e^{-2K[e](-r_0+r_1)} k[e] K[e]^3 m_0^2 m_1^2) /$$


$$\left( \left( K[e]^2 m_0^2 + k[e]^2 m_1^2 + \frac{K[e] m_0 (m_0 - m_1)}{r_0} \right) (1 + K[e] r_0) \left( k[e]^2 m_1^2 + \left( K[e] m_0 + \frac{-m_0 + m_1}{r_1} \right)^2 \right) \right);$$

```

```
 $\tau[En]$ 
```

```
2.809
```

```
Plot3D[Re[Sm[En + I si]], {En, 84.9418, 84.9423}, {si, -0.1179, -0.1172},
  AspectRatio -> 2 / 1 / 2,
  PlotPoints -> 40, Mesh -> True, FaceGrids -> None, PlotRange -> {-4000, 4000},
  AxesLabel -> {"Re", "Im", "S"}, ViewPoint -> {-2.569, -2.208, 0.650}]
```

